

GA-Mitglieder auf Internationaler HPC-Konferenz SC'12

Verschiedene Mitglieder der Gauß-Allianz beteiligen sich vom 10. bis 16. November an der Supercomputing Conference (SC'12) – dieses Jahr in Salt Lake City, USA. Die bedeutendste internationale Konferenz der HPC-Community dient dem Austausch von mehr als 10.000 Wissenschaftlern, Anwendern und Entscheidungsträgern hinsichtlich der neuesten Entwicklungen aller Bereiche des Hochleistungsrechnens. Die deutschen HPC-Zentren präsentieren sich mit eigenen Ständen oder Engagement in Workshops, Vorträgen, Tutorials und Diskussionsrunden. • So stellt das SCC des KIT Forschungsarbeiten aus den Bereichen Datenmanagement und -analyse, sichere IT-Föderationen, Computational Science & Engineering sowie dynamische IT-Infrastrukturen vor; Schwerpunktthemen werden das Grid Computing Centre Karlsruhe (GridKa) und die am SCC angesiedelten Simulation Laboratories (SimLabs) sowie das Management großskaliger Daten sein. • Das Themenspektrum des ZIH umfasst neben der Beteiligung an mehreren wissenschaftlichen Veranstaltungen die Präsentation der Aktivitäten des CUDA Center of Excellence der TU Dresden, innovative Speicher-, Rechnerraum-, und Administrationslösungen bis hin zu Anwenderprojekten aus dem datenintensiven und heterogenen Rechnen. • Das RRZE bietet ein Tutorial zum Thema Multi-core-Optimierung an und ist am Tutorial über Hybrides Programmieren mit MPI und OpenMP beteiligt. • Das DKRZ präsentiert sowohl seine Arbeit als Rechenzentrum als auch seine Ergebnisse im Bereich Klimaforschung. Es veranstaltet zudem wieder den „Climate Knowledge Discovery Workshop“. • Das HLRS gibt Einblicke in seine HPC-, Visualisierungs- und Grid Computing-Aktivitäten und präsentiert Middleware-Komponenten für Cloud Computing. Seine Entwicklungswerkzeuge wie Covise, Open MPI und MARMOT stellt das HLRS ebenso vor wie Forschungsprojekte aus den Bereichen Ingenieurwissenschaften, Maschinenbau, Medizin, Biologie, Chemie und Physik. • Das RZG wird in der Poster-Session die überlegene Leistung des inzwischen weltweit eingesetzten, hochskalierbaren ELPA-Eigenwertlösers – aus dem gleichnamigen BMBF-Projekt des ersten HPC-Calls – für einen sehr großen Bereich von Problemgrößen demonstrieren. • Das RZ der RWTH Aachen beteiligt sich an einem Tutorial zum Thema Fortgeschrittene OpenMP-Programmierung sowie an zwei BOF-Sitzungen zu den Themen Multi-core- und Task-parallel-Programmierung. Weitere Informationen zu den Aktivitäten der GA-Zentren: www.gauss-allianz.de/veranstaltungen.

HLRS-Erweiterungsbau und CAVE eröffnet

Am 31.10.2012 wurde der Erweiterungsbau des HLRS mit einem offiziellen Festakt eröffnet. Der zweistöckige Erweiterungstrakt ergänzt den sieben Jahre alten Bestandsbau, der den Rechnerraum mit dem HPC-System Hermit beinhaltet. Das Gebäude umfasst nun eine Gesamtnutzfläche von 2700 m² und verfügt damit über ausreichend Raum, alle bislang auf verschiedene Gebäude verteilten Mitarbeiter/innen des HLRS unter einem Dach zusammen zu bringen. Herzstück des neuen HLRS-Baus ist das sich über drei Stockwerke erstreckende Visualisierungszentrum für 3D-Projektion und Virtuelle Realität („CAVE“). Die CAVE verfügt über fünf Projektionsflächen – drei Wände, Decke und Boden –, die einen Würfel von 2,7 m Kantenlänge ergeben. Die Projektoren, single chip DLP Beamer mit zwei getrennten Eingängen für das linke und das rechte Bild, liefern eine Auflösung von 1920x1200 Bildpunkten. Betrieben wird die CAVE von einem Cluster von 22 Intel Sandybridge-Knoten mit 11 K5000 und 11 K6000 NVIDIA Quadro GPUs und QDR Infiniband interconnect. (Kontakt: [Michael Resch](mailto:Michael.Resch@hlrs.de), HLRS)

Virtuelle Realität und Visualisierung (V2C) am LRZ

Am 25. Oktober 2012 wurde am Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften das „Zentrum für Virtuelle Realität und Visualisierung (V2C)“ eröffnet. Es wurde im Rahmen der Erweiterung des LRZ in einem eigenen Gebäudeteil eingerichtet und ist mit dem neuesten Stand der Technik ausgestattet. Bau und technische Ausstattung finanzierten Bund und Freistaat Bayern gemeinsam im Rahmen des Ausbaus des LRZ zum Zentrum für Supercomputing. Weitere Informationen: <http://v2c.lrz.de>. (Kontakt: [Ludger Palm](mailto:Ludger.Palm@lrz.de), LRZ)

Zugang zu den besten Höchstleistungssystemen

Die SICOS GmbH (Simulation, Computing, Storage) wurde 2011 vom Karlsruher Institut für Technologie (KIT) und der Universität Stuttgart gegründet. Gesellschafter sind das KIT mit dem Steinbuch Centre for Computing (SCC) und die Universität Stuttgart mit dem Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS), unterstützt vom Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg. Die Aufgabe der SICOS GmbH besteht darin, Unternehmen und Institutionen einen einfachen Zugang zu den besten Ressourcen im High Performance Computing (HPC), Data Intensive Computing und Distributed Computing zu ermöglichen und den Weg zur Nutzung dieser Höchstleistungssysteme zu erleichtern.

Die SICOS GmbH informiert, berät und vermittelt bei allen Fragen rund um die Themen numerische Simulation, Höchstleistungsrechnen und Handhabung großer Datenmengen. (Kontakt: [Andreas Wierse](#), SICOS GmbH).

DFG-Schwerpunktprogramm SPPEXA

Im DFG-Schwerpunktprogramm 1648 „Software for Exascale Computing“ (SPPEXA) wurden im Oktober die erfolgreichen Projektanträge der ersten Förderperiode bewilligt. Ab Januar 2013 werden sich 13 Kooperationsprojekte mit verschiedenen Herausforderungen für die Software-Seite des Themas Exascale Computing befassen. Mindestens zwei der Kategorien Algorithmen, Anwendungen, Programmierung, System-Software, Datenmanagement und Software-Werkzeuge werden von jedem der 13 Projektverbände mit jeweils drei bis fünf Partnern über drei Jahre bearbeitet. Das DFG-Schwerpunktprogramm SPPEXA, das Ende 2011 ausgeschrieben worden war, ist eine Initiative der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG). Damit werden u.a. die Empfehlungen des International Exascale Software Projects (IESP) und der European Exascale Software Initiative (EESI) aufgegriffen und in konkrete Forschungsprojekte überführt. Evolutionäre Ansätze sind ebenso vertreten wie revolutionäre Konzepte, um die ganz besonderen Herausforderungen des HPC auf Exascale-Niveau zu bewältigen. Neben spezifischen Forschungsvorhaben werden verbindende Aktivitäten ein fester Bestandteil von SPPEXA sein; einerseits zum Austausch zwischen den Projekten und andererseits im Rahmen gemeinsamer Fortbildungsveranstaltungen. Eine zweite dreijährige Förderperiode mit etwa gleichem Umfang ist vorgesehen. Das Schwerpunktprogramm wird auch auf der bevorstehenden SC'12-Konferenz in Salt Lake City präsentiert. Zusätzlich wird sich der zuständige Programmdirektor der DFG vor Ort mit Kollegen der National Science Foundation (NSF) und anderen Agencies über Kooperationsmöglichkeiten auf internationaler Ebene austauschen. (Kontakt: [Marcus Wilms](#), DFG)

HPC-Framework zur Lösung inverser Streuprobleme

Die nichtinvasive Erkennung verborgener Strukturen ist ein typisches „inverses Problem“ in Bereichen von Materialprüfung bis zur medizinischen Diagnostik. Im Rahmen des durch das BMBF seit letztem Jahr geförderten Verbundprojekts „HPC-Framework zur Lösung inverser Streuprobleme auf strukturierten Gittern mittels Manycore-Systemen und Anwendung für 3D-bildgebende Verfahren“ (HPC-FLiS) entwickeln das Institut für Nachrichtentechnik der TU Dresden gemeinsam mit dem ZIH, dem DLR in Köln, der Universität Paderborn und der Siemens AG ein Framework – „Scalable Framework for Explicit Solvers“ (ScaFES) –, das die hochparallele Lösung inverser Streuprobleme auf strukturierten Gittern ermöglicht. Durch dieses Framework können explizite, auf strukturierten Gittern basierende Lösungsverfahren auf heterogenen HPC-Plattformen effizient und hoch-skalierbar implementiert

werden. Neben der Datenhaltung und Kommunikation wird auch die Anbindung an eine Open-Source-Bibliothek für algorithmisches Differenzieren (ADOL-C) bereitgestellt, so dass mit geringem Mehraufwand Ableitungen für eine gradientenbasierte Optimierung zur Lösung von inversen Problemen berechnet werden können. Eine abschließende Validierung durch ein zertifiziertes Software-Testlabor soll zur Qualitätssicherung die Nutzung der entstandenen Software fördern; auch über den Kreis der Projektpartner hinaus. Die Praxistauglichkeit wird dabei an Anwendungsbeispielen der Siemens AG demonstriert. Weitere Informationen: www.gauss-allianz.de/hpc-flis (Kontakt: [Sebastian Hegler](#), TU Dresden)

Skalierbarkeit durch Mehrgitterlöser

Die Lösung großer Gleichungssysteme ist eine Kernaufgabe vieler Simulationsaufgaben und entscheidet oft über die Komplexität des Gesamtprozesses. Das vom BMBF in der ersten Ausschreibungsrunde auf dem Gebiet „HPC-Software für skalierbare Parallelrechner“ geförderte Verbundprojekt „Advanced Solvers Integrated Library (ASIL)“ hat sich mit der Entwicklung effizienter und robuster Lösungsverfahren für solche Gleichungssysteme befasst. Dazu wurden filternde algebraische Mehrgitterverfahren weiterentwickelt, mit H-Matrizen kombiniert und Verfahren auf Eigenwert- und Optimierungsprobleme übertragen. Durch Teilprojekte mit Industriebeteiligung wurde die Umsetzung in die Praxis sichergestellt. Wesentliche Ergebnisse von ASIL sind u.a. ein Mehrgitterlöser, der mit über 90% Effizienz auf 218 Kernen skaliert, die Berechnung der Thermomechanik einer Herdplatte sowie deren Optimierung. ASIL baut auf der Entwicklung von UG4 und HLibPro auf. An dem Forschungsprojekt waren neben den Industriepartnern CST GmbH, E.G.O. Blanc und Fischer & Co. GmbH und Porsche Engineering Arbeitsgruppen des Max Planck-Instituts für Mathematik in den Naturwissenschaften, der Università della Svizzera Italiana, Lugano, des HLRS der Universität Stuttgart, der Universität Trier, des KIT, sowie das Goethe Center for Scientific Computing (G-CSC) der Universität Frankfurt beteiligt. Weitere Informationen: www.gauss-allianz.de/asil (Kontakt: [Gabriel Wittum](#), G-CSC)

Veranstaltungen

- 26.-28.11.2012: [Parallel Programming MPI and OpenMP](#), JSC, Jülich
- 6./7.12.2012: [Node-Level Performance Engineering](#), LRZ, Garching
- 10.-12.12.2012: [GPU Programming using CUDA](#), HLRS, Stuttgart
- 13.-14.12.2012: [Introduction to Unified Parallel C \(UPC\) and Co-array Fortran \(CAF\)](#), HLRS, Stuttgart